

Complex multiphase materials: microstructure characterization and finite element property predictions

Doctoral Thesis**Author(s):**

Heggli, Martin

Publication date:

2005

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005091344>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Diss. ETH No. 16261

Complex Multiphase Materials:
Microstructure Characterization and
Finite Element Property Predictions

DISSERTATION

submitted to the

EIDGENÖSSISCHE TECHNISCHE HOCHSCHULE
ZÜRICH

for the degree of

DOCTOR OF SCIENCES

presented by

MARTIN HEGGLI

Dipl. Werkstoff-Ingenieur, ETH Zürich

born 28.09.1973

citizen of Luzern and Müswangen (LU)

accepted on the recommendation of

PD Dr. Andrei A. Gusev, examiner

Prof. Dr. Ulrich W. Suter, co-examiner

Prof. Dr. Hans Christian Öttinger, co-examiner

Zürich, 2005

Abstract

In the first part of this thesis short fibre reinforced polymer composites have been studied as examples for composites containing particulate inclusions. The 3D fibre orientation state was measured and computer models representing the real microstructure of the material were generated. It was demonstrated that with the finite element method (FEM) used very accurate predictions of the effective elastic properties of these composites are possible.

The widely used in industry micromechanical models of Halpin-Tsai and Tandon-Weng for unidirectional composites were compared to accurate direct numerical predictions. It was shown that the Tandon-Weng approach gives relatively better predictions. However, the accuracy of both models was demonstrated to be not sufficient.

It was shown that the effect of arbitrary fibre orientation states, which can be described by a series of orientation tensors, can be taken into account by orientation averaging of results obtained by direct numerical predictions for unidirectional composites. Comparison with direct numerical predictions for the arbitrary fibre orientation state demonstrated the relatively good accuracy of the orientationally averaged predictions.

In the second part of this work, two different composite materials with complex interpenetrating microstructures have been studied: a melt processed composite of 50 vol.-% low density polyethylene with 50 vol.-% phosphate glass and a porous graphite infiltrated with approximately 15 vol.-% of an aluminium alloy.

The microstructure of both materials has been measured with X-ray microtomography. The resulting images were segmented to discriminate the different phases of the composite. The three-dimensional tomography information has been used to directly build 3-D finite element models. Linear brick elements have been used. Effective materials properties have been calculated by a finite element method (FEM).

The effective electrical conductivity of the low density polyethylene/phosphate glass composites has been calculated as a test for the continuity of the two phases. It was found that both phases are continuous.

Numerically calculated elastic properties are within the rigorous Hashin-Shtrikman variational bounds. However, the experimentally measured stiffness is much smaller. By studying local stresses that develop inside the structure during cooling from production temperature to room temperature in a small

but significant number of elements relatively high tensile stresses were found. This effect probably introduces damage in the stiff glass phase which results in a lower than expected stiffness of the composite and in its high brittleness.

In the graphite/aluminium composites it was found that the representative volume element for the electrical conductivity is very large. However, by calculating an ensemble average over a number of subvolumes accurate predictions for the overall electrical conductivity could be made. By doing this, relatively small models ($100 \times 100 \times 100$ voxels) were sufficient to get accurate results. Therefore computing time could be kept relatively short.

An experimentally observed decrease in the electrical conductivity after a cyclic thermal treatment could be reproduced in the simulation to some extent. By filling the pores in the model of the thermally treated sample it was shown that pores inside the conducting aluminium channels are responsible for the drop in the electrical conductivity.

The numerically predicted Young's modulus was smaller than the measured values. A series of model calculations showed that the numerical results are reasonable. It remains unclear why the measured stiffness is this high, as a matter of fact far above the Hashin-Shtrikman variational bound. Possibly, the materials parameters that were used for the calculations could not be determined accurately enough.

Thermal conductivity and thermal expansion coefficient of the graphite/aluminium composite have also been calculated. They were in relatively good accordance with the experimental results.

Zusammenfassung

Im ersten Teil dieser Arbeit wurden Kurzfaser-verstärkte Polymer Komposite als ein Beispiel für Verbundwerkstoffe mit partikelförmigen Einschlüssen untersucht. Der dreidimensionale Orientierungszustand der Fasern wurde gemessen und Computer-Modelle erzeugt, die repräsentativ für die reale Mikrostruktur des Materials sind. Es wurde gezeigt, dass mit der benutzten Finite Element Methode (FEM) sehr präzise Voraussagen über die effektive elastischen Eigenschaften des Verbunds gemacht werden können.

Die beiden in der Industrie oft verwendeten mikromechanischen Modelle von Halpin-Tsai und Tandon-Weng für unidirektionale Komposite wurden mit präzisen direkten, numerischen Voraussagen verglichen. Es wurde gezeigt, dass der Tandon-Weng Ansatz relativ bessere Voraussagen macht. Allerdings wurde auch gezeigt, dass beide Modelle nicht ausreichend genaue Ergebnisse liefern.

Es wurde gezeigt, dass der Einfluss von beliebigen Faserorientierungszuständen, wie sie durch eine Reihe von Orientierungstensenoren beschrieben werden können, mit Hilfe einer Orientierungsmittelung berücksichtigt werden können, indem die Ergebnisse der direkten numerischen Voraussagen für unidirektionale Komposite über die Orientierung gemittelt werden. Der Vergleich mit direkten numerischen Voraussagen für die Strukturen mit einem beliebigen Orientierungszustand hat die relativ gute Genauigkeit der mittels Orientierungsmittelung erhaltenen Voraussagen gezeigt.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurden zwei verschiedene Verbundwerkstoffe mit komplexer interpenetrierender Mikrostruktur untersucht: ein aus der Schmelze verarbeiteter Verbund von 50 vol.-% Polyethylen (LDPE) mit 50 vol.-% Phosphatglas und ein poröser Graphit, der mit ungefähr 15 vol.-% einer Aluminium-Legierung infiltriert ist.

Die Mikrostruktur der beiden Materialien wurde mittels Röntgen-Mikrotomographie abgebildet. Die erhaltenen Schnittbilder wurden segmentiert, um die verschiedenen Phasen des Verbunds zu trennen. Die dreidimensionale tomographische Information wurde dann dazu verwendet, direkt 3-D Computer Modelle zu erzeugen. Die effektiven Eigenschaften der Komposite wurden mit einer Finite Element Methode (FEM) berechnet.

Die effektive elektrische Leitfähigkeit des Polyethylen/Phosphatglas Verbundes wurde berechnet, um die Kontinuität der beiden Phasen zu testen. Es hat sich gezeigt, dass beide Phasen kontinuierlich sind.

Die numerisch berechneten elastischen Eigenschaften liegen innerhalb der

strengen Hashin-Shtrikman Grenzen. Die experimentell gemessene Steifigkeit hingegen ist deutlich kleiner. Die Berechnung der lokalen thermischen Spannungen, die beim Abkühlen von der Herstell- zu Zimmertemperatur auf gebaut werden, zeigte dass in einer kleinen aber signifikanten Zahl von Elementen relativ hohe Spannungen auftreten. Wahrscheinlich führen diese zu Schädigungen in der steiferen Glas-Phase, was zu einer Komposit-Steifigkeit, die kleiner als erwartet ist, und zu einer grossen Sprödigkeit führt.

Für die Graphit/Aluminium Komposite wurde festgestellt, dass das repräsentative Volumenlement für die elektrische Leitfähigkeit sehr gross ist. Andererseits konnten durch die Berechnung von Ensemble-Mittelwerten von einer Anzahl Subvolumen zutreffende Voraussagen für die effektive elektrische Leitfähigkeit gemacht werden. Es war daher ausreichend, Berechnung mit relativ kleinen Modellen ($100 \times 100 \times 100$ Voxel) zu machen, um korrekte Ergebnisse zu erhalten. Die benötigte Rechenzeit konnte daher relativ kurz gehalten werden.

Die experimentell beobachtete Abnahme der elektrischen Leitfähigkeit nach einer zyklischen Wärmebehandlung konnte in der Simulation bis zu einem gewissen Grad reproduziert werden. Durch das Auffüllen der Poren in der wärmebehandelten Probe konnte gezeigt werden, dass Poren in den leitenden Aluminiumkanälen für die Abnahme der elektrischen Leitfähigkeit verantwortlich sind.

Der numerisch vorausgesagte Elastizitäts-Modul war deutlich kleiner als die gemessenen Werte. Eine Reihe von Modellrechnungen hat gezeigt, dass die numerischen Ergebnisse vernünftig sind. Es bleibt unklar, warum die gemessene Steifigkeit so gross ist, nämlich sogar deutlich grösser als die obere Hashin-Shtrikman Grenze. Möglicherweise konnten die Materialparameter, die für die Berechnung verwendet wurden, nicht genügend genau bestimmt werden.

Die Wärmeleitfähigkeit und der Wärmeausdehnungskoeffizient der Graphit/Aluminium-Komposite wurde berechnet. Sie stimmten gut mit den experimentell gemessenen Werten überein.